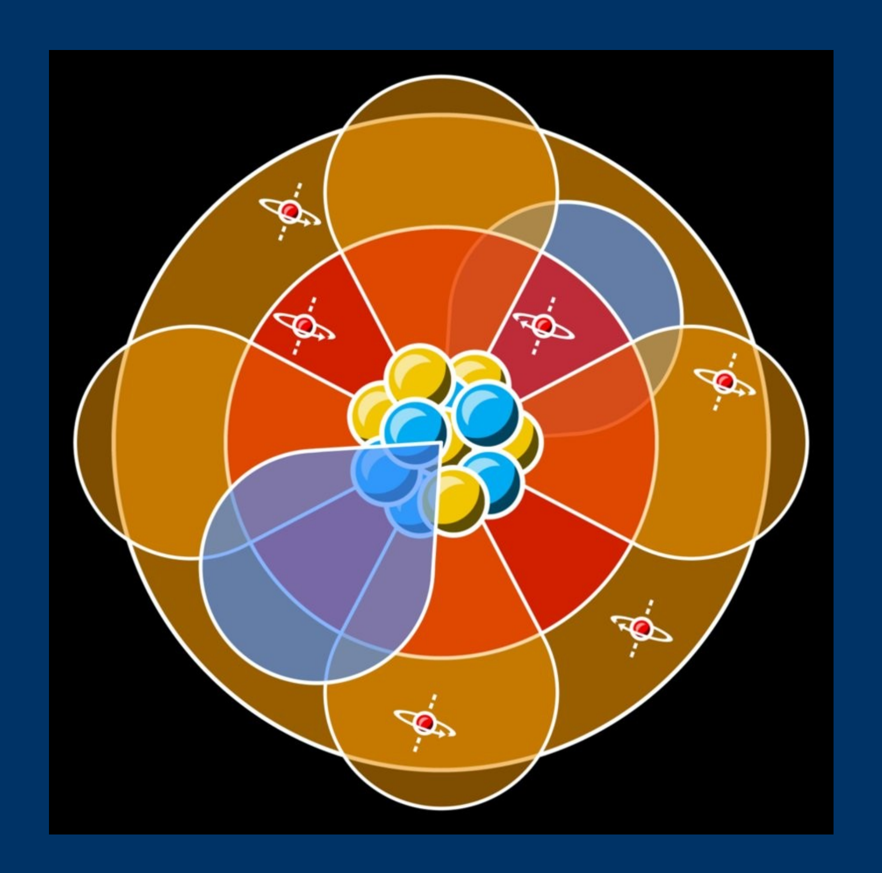
Átomo Mecano-Cuántico



M en C Rafael Govea Villaseñor

Biólogo por la UAM-I

M en C por el CINVESTAV-IPN

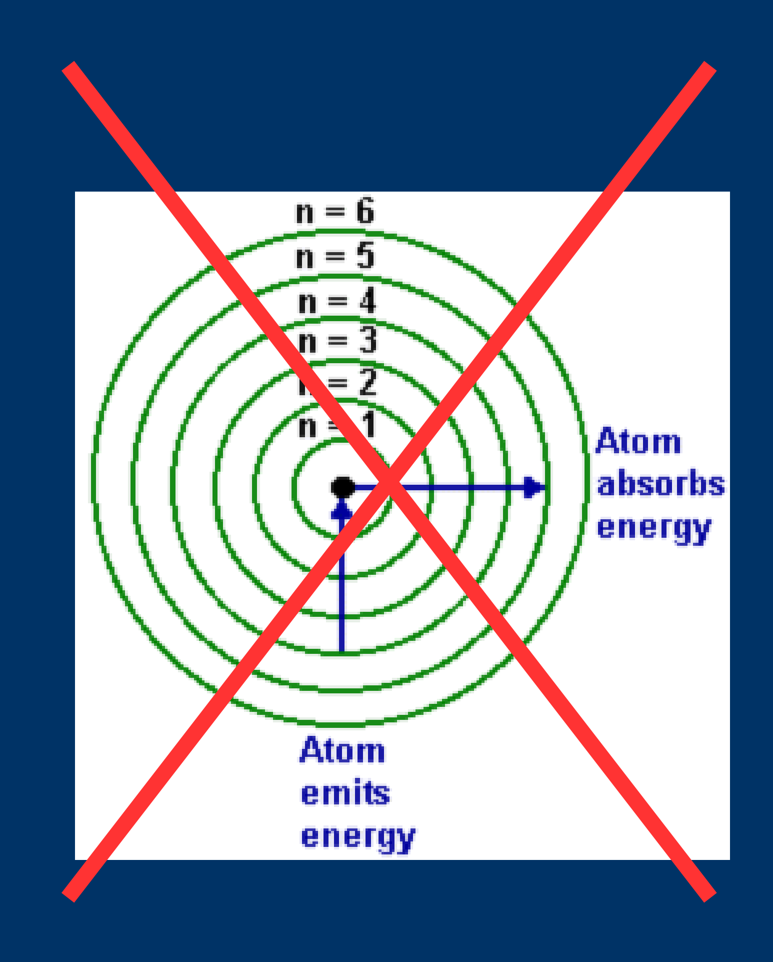
Versión 1.1 15/10/2017 19-10-2023

¿Qué Modelo se propuso antes que el modelo actual?

El modelo del átomo de Hidrógeno de Bohr

El único electrón del hidrógeno podía ubicarse en diferentes órbitas con energía múltiplos de la constante de Planck

Sin embargo sólo era válido para átomos con 1 electrón (el H y los iónes He^{1+} y Li^{2+}.

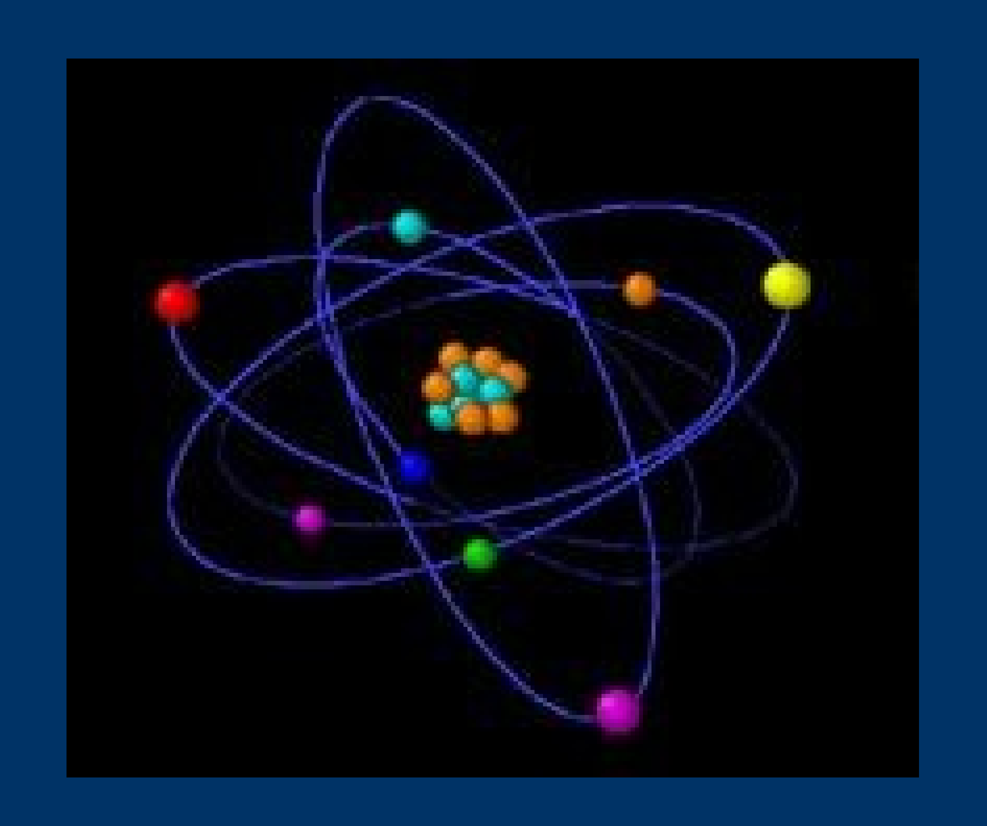


¿Cómo se imaginaban los demás el átomos?

Como si fuese un sistema planetario, electrones rodeando en sus órbitas propias al núcleo atómico

Bohr había propuesto el número cuántico principal, *n*. Representando los niveles o capas

Sommerfeld propuso un segundo número cuántico, *l* Representando subniveles ocupando órbitas elípticas



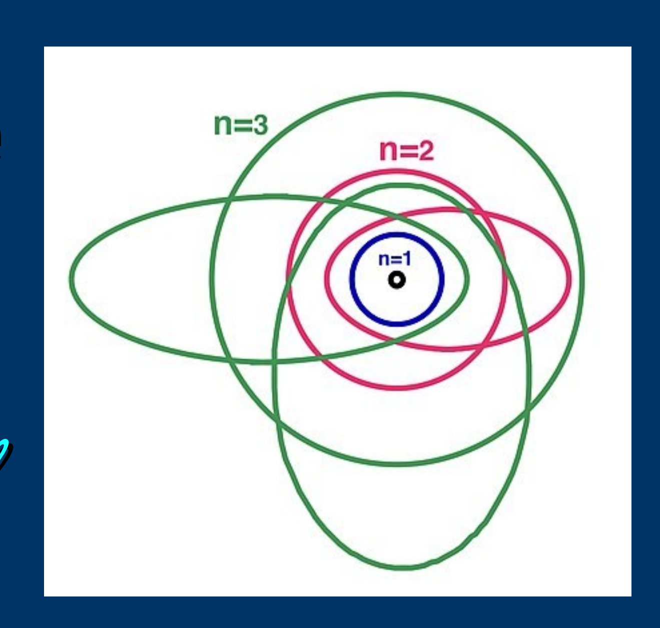
Ante el fracaso del Modelo de Sommerfeld ¿Qué ocurrió?

Su modelo de 1916 fue incapaz de predecir los espectros de rayas de los demás elementos



Alemania, 1868-1951

Pero resaltó la existencia de subcapas en la envoltura electrónica de los átomos, agregó el número cuántico ℓ



¿Qué cambios permitió proponer el Modelo Mecano-cuántico?

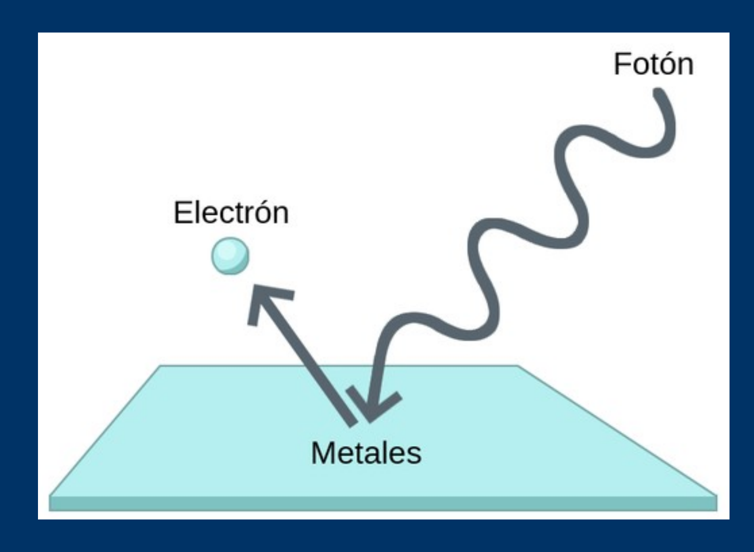
El concepto de luz como partícula, Newton (S18)...

Fue sustituido por la luz como dualidad (*duo*- = 2)
De Broglie (S20)

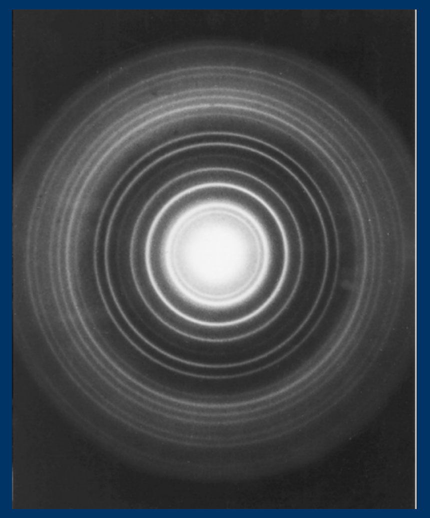
O como onda, (S19)

¿El concepto de los electrones cambió en el mismo sentido?

El electrón como partícula o como onda,



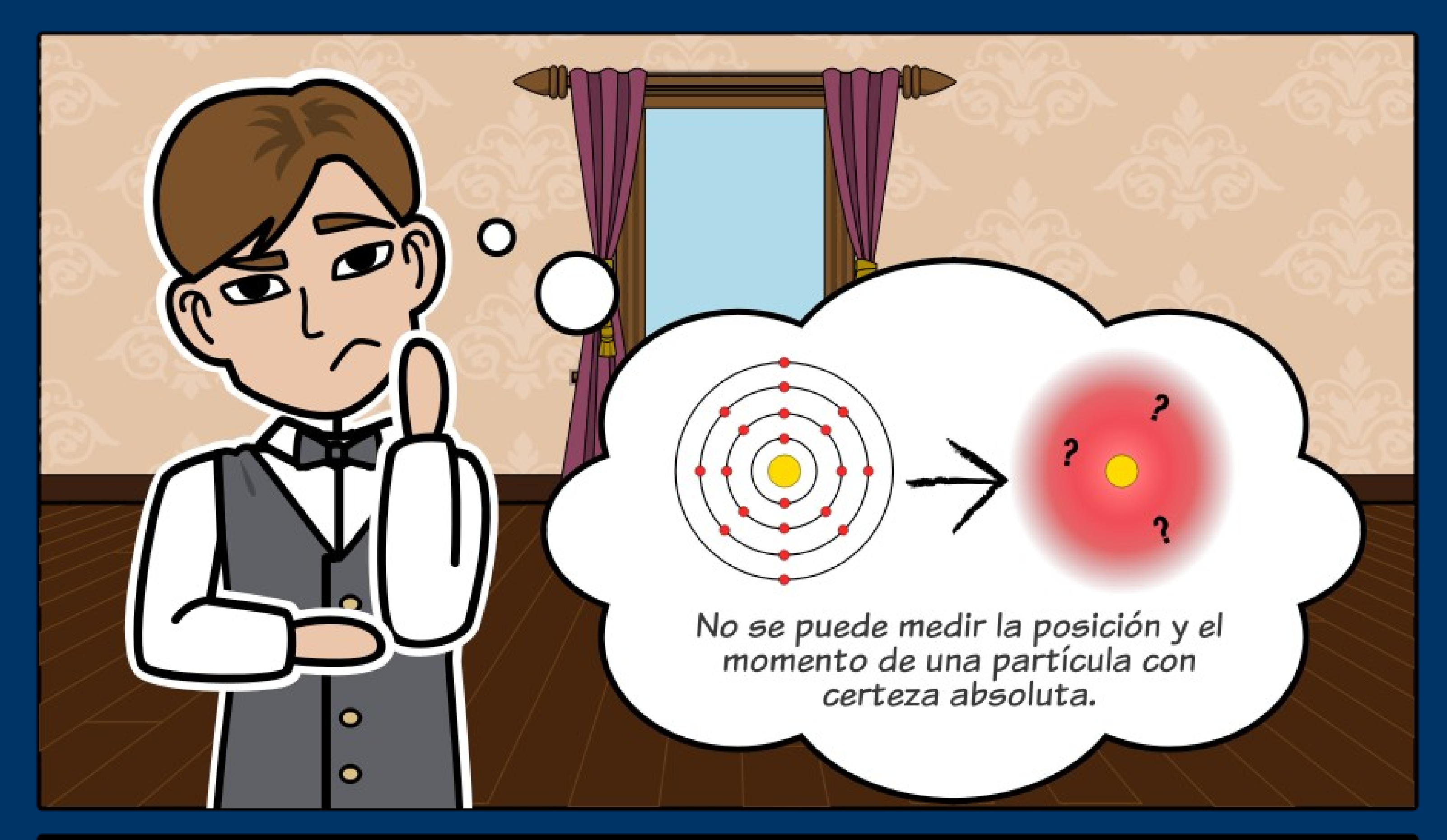
Efecto Fotoeléctrico



Difracción de electrones por placa de Al

Fue sustituido por el electrón, de hecho cualquier partícula, como dualidad (*duo-* = 2)

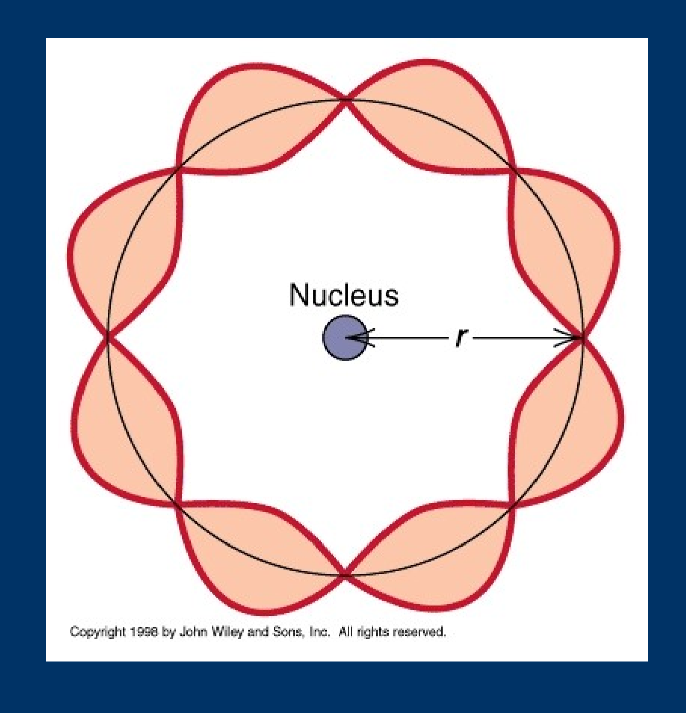
Aportación de Heisenber



WERNER HEISENBERG

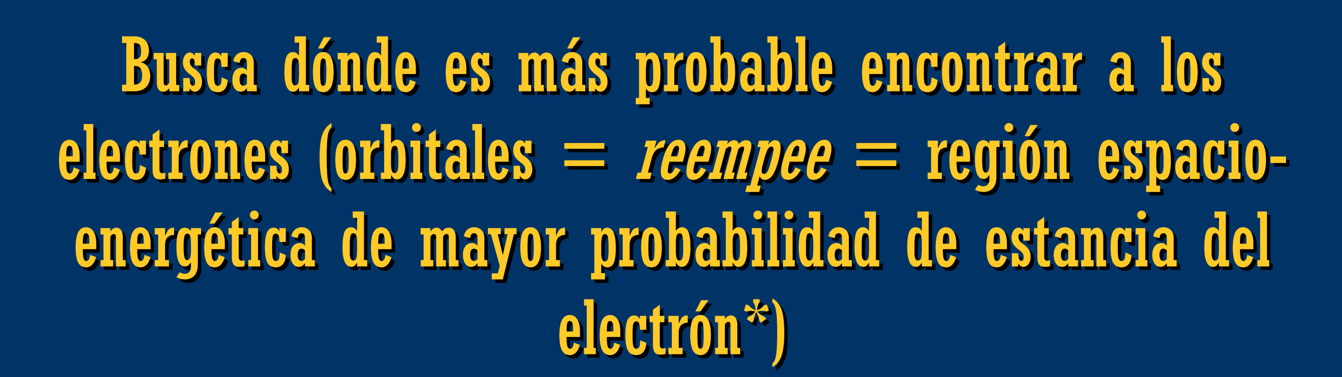
Werner Heisenberg fue un físico alemán que fue uno de los pioneros más importantes de la mecánica cuántica y ganó un Premio Nobel en 1932. Sus mayores contribuciones a la física fueron el desarrollo de la Mecánica Matriz y el Principio de Incertidumbre.

Así que Schrödinger...

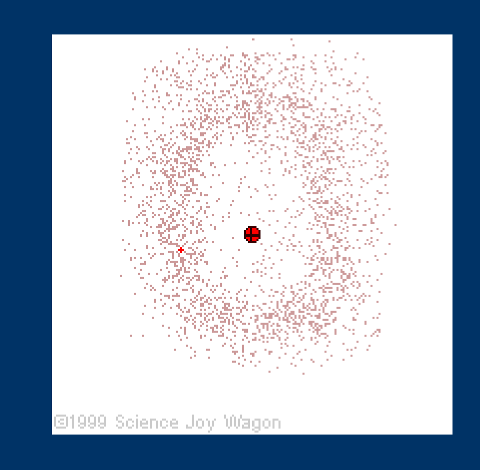


Abandona la idea de electrón como partícula y lo trata como onda

Deja de lado seguir la trayectória del electrón (no hay órbitas)



Busca dónde es más probable encontrar a los electrones (orbitales = *reempee* = región espacio-energética de mayor probabilidad de estancia del electrón*)



Usa los números cuánticos n y ℓ para ordenar los distintos orbitales según su energía creciente

* De hecho 2 electrones de espines opuestos (-1/2 y +1/2)

¿Qué información dan los números cuánticos?

El número cuántico principal *n* nos dice la capa de energía

El número cuántico secundario *ℓ* nos dice la subcapa y forma del orbital

El número cuántico terciario *m* da la orientación espacial, el número de orbitales y el número máximo de electrones en cada subcapa

El número cuantico cuaternario m_s (espín) diferencía a los 2 electrones que caben en cada orbital -1/2 y +1/2

Rafael Govea V.

¿Qué valores adopta el número cuántico principal *n*?

Toma valores enteros de 1 en adelante

Para los elementos existentes naturales o sintéticos son 1, 2, 3, 4, 5, 6 y 7 *

Cada uno de esos valores corresponde a las capas de electrones que rodean al núcleo atómico

El número *n* del último electrón del átomo de cada elemento nos indica en cual renglón (periodo) de la tabla periódica se ubica ese elemento

* Si se lograse fabricar un átomo del elemento 119, éste tendría su último electrón en la capa 8

Rafael Govea V.

¿Qué valores adopta el número cuántico secundario ℓ?

Toma valores enteros de 0 hasta ***n-1***

Para los elementos existentes naturales o sintéticos ℓ sólo adopta los valores: 0, 1, 2, y 3 *

Cada uno de esos valores corresponde a diferentes subcapas

También cada valor de ℓ determina el tipo de orbital: 0 = orbital s, 1 = orbital p, 2 = orbital d, 3 = orbital f, 4 = orbital g...

* Los electrones de átomos exitados pueden ocupar orbitales con $\ell > 3$

¿Qué valores adopta el número cuántico terciario *m* ?

Toma valores enteros desde $-\ell$ a $+\ell$, pasando por 0

Para los elementos existentes naturales o sintéticos *m* eventualmente adopta máximo, los valores: -3, -2, -1 0, +1, +2, y +3 *

#valores de *m* de acuerdo al valor de ℓ: 1 para $\ell = 0$; 3 para $\ell = 1$, 5 para $\ell = 2$, 7 para $\ell = 3$, 9 para $\ell = 4$

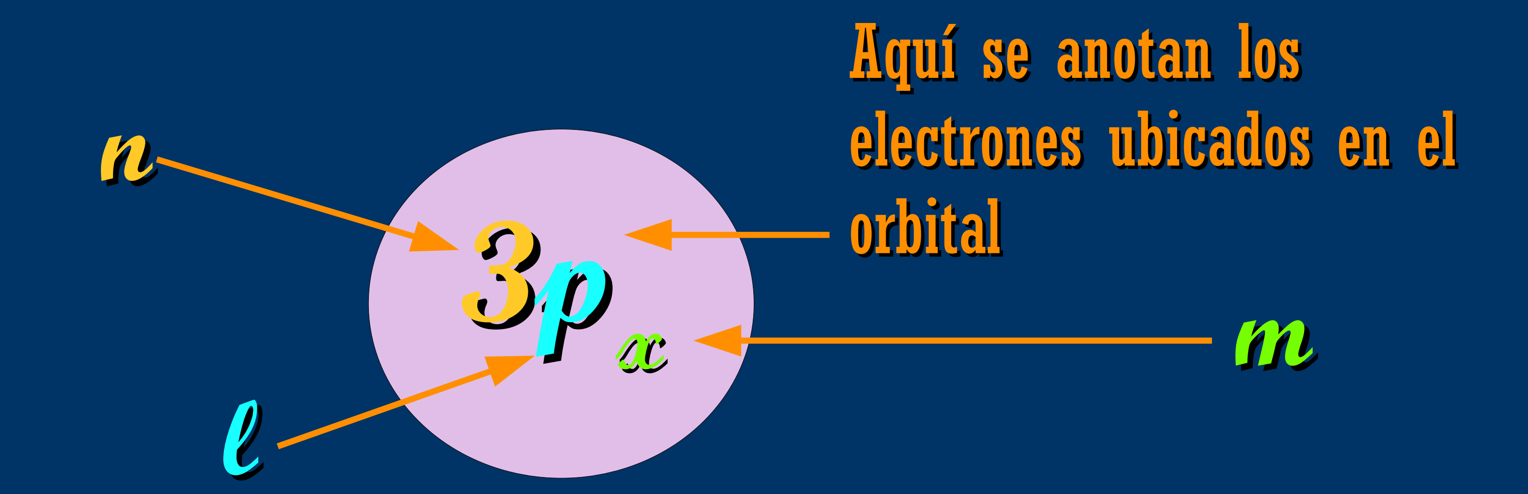
El # de orbitales de cada tipo es igual al número de valores de m:
En cada nivel 1 orbital s, 3 orbitales p, 5 d, 7 f, 9 g, etc.

* Los electrones de átomos excitados pueden ocupar orbitales con $m > \pm 3$

Rafael Govea V.

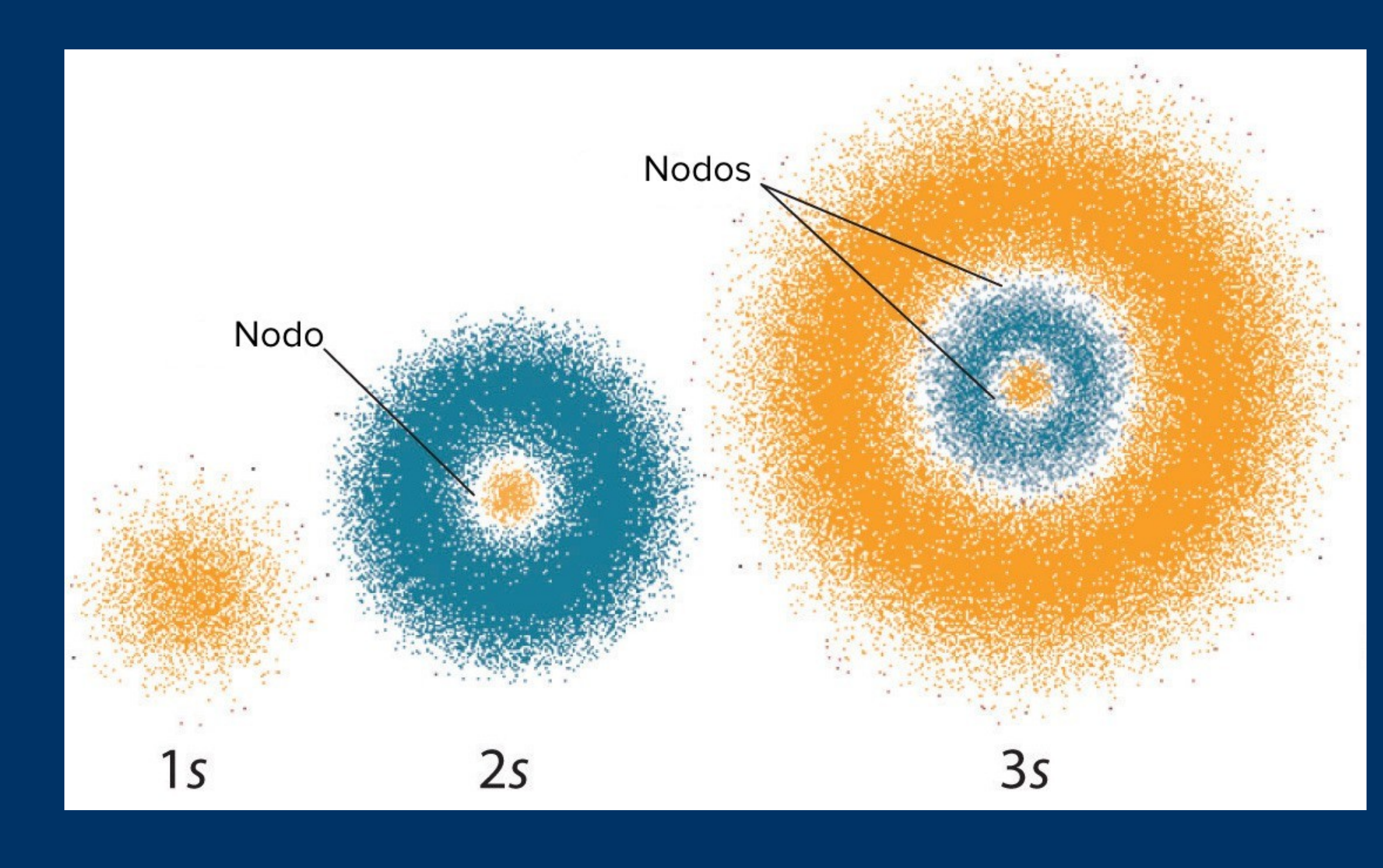
¿Cómo se denominan los orbitales?

Como cada orbital está dado por 3 números cuánticos:



¿Cómo es la forma de los orbitales?

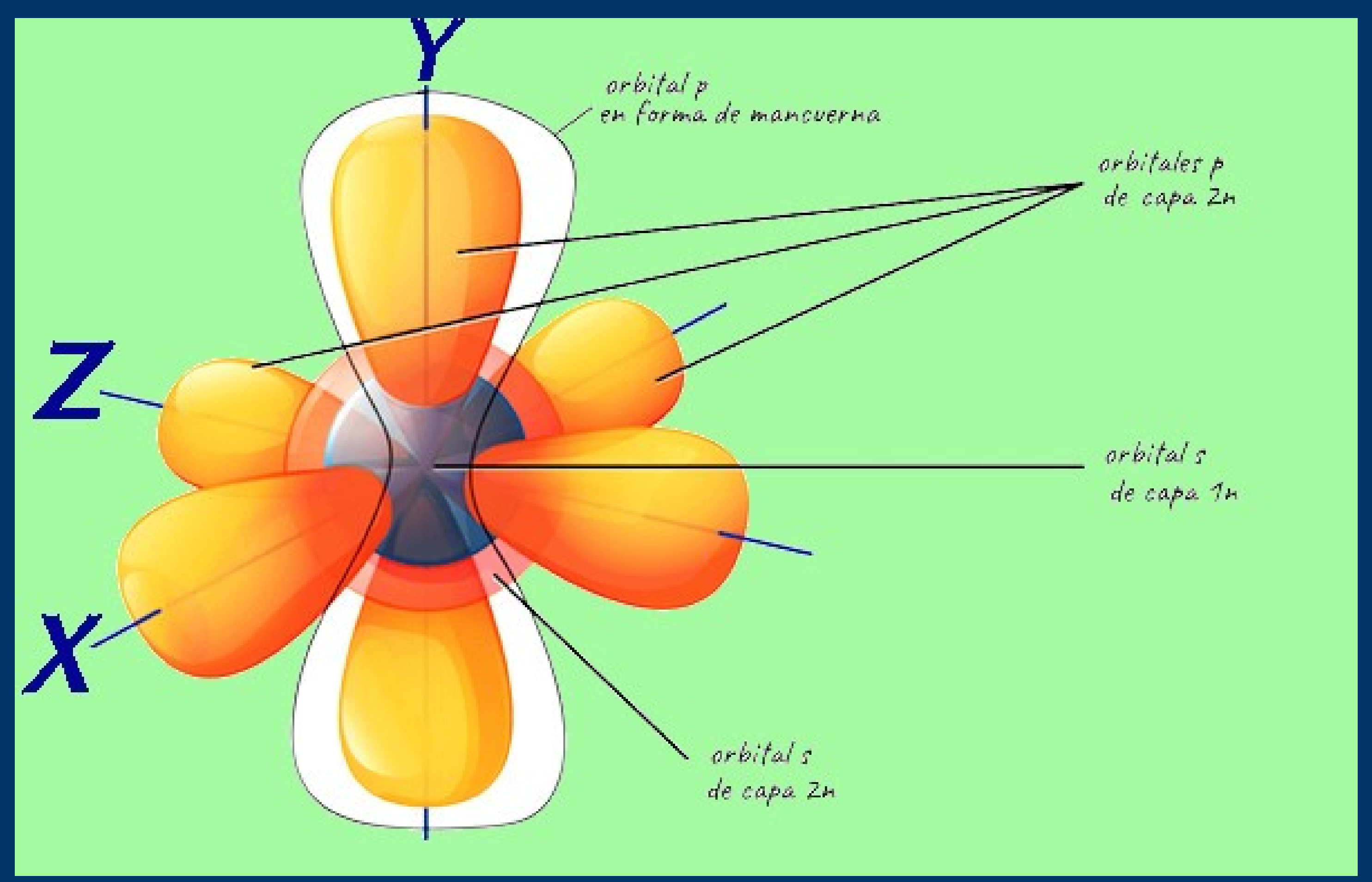
Para $\ell = 0$, orbitales tipo s



Esferas huecas de cierto grosor y de radio creciente con n

¿Cómo es la forma de los orbitales?

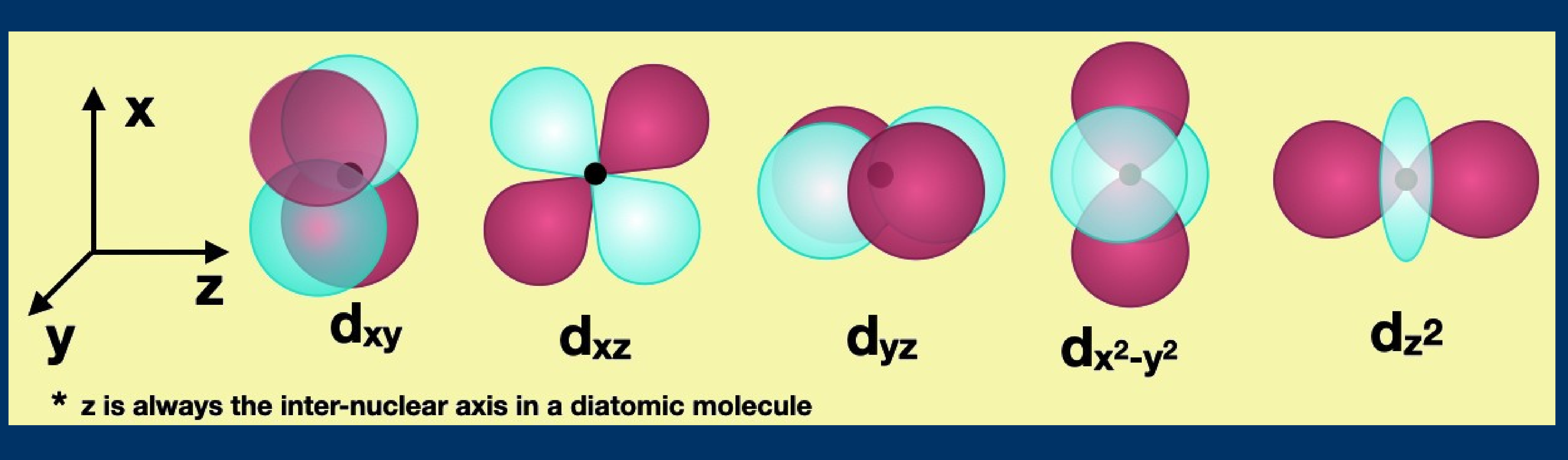
Para $\ell = 1$, orbitales tipo p



Bilóbulos huecos de cierto grosor a modo de peras alineadas a un eje **X, Y y Z**

¿Cómo es la forma de los orbitales?

Para $\ell = 2$, orbitales tipo d

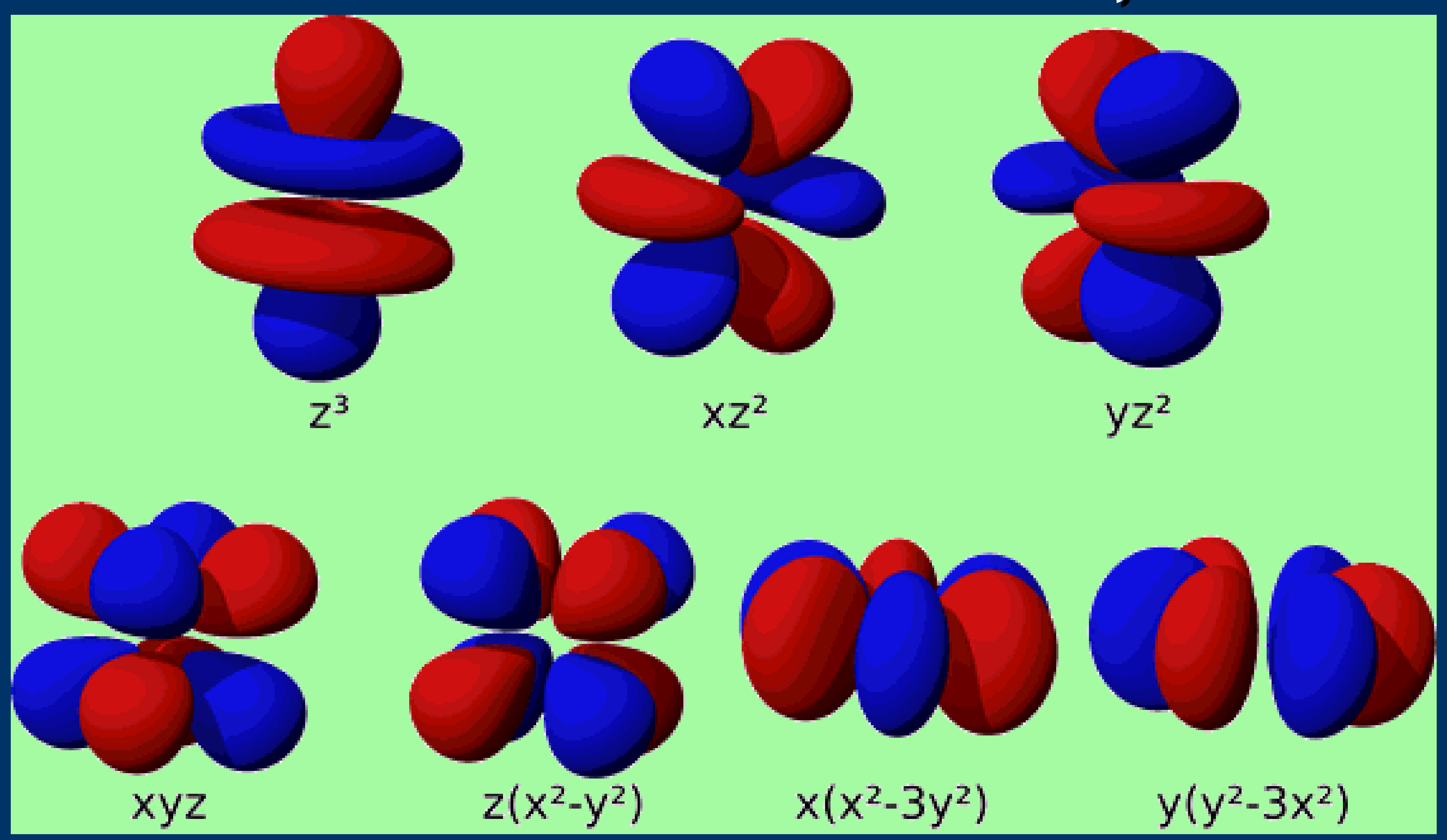


Casi todos tetralobuloados a modo de peras alineadas a varios ejes

XY, XZ, YZ, X^2-Y^2 y Z^2

¿Cómo es la forma de los orbitales?

Para $\ell = 3$, orbitales tipo f



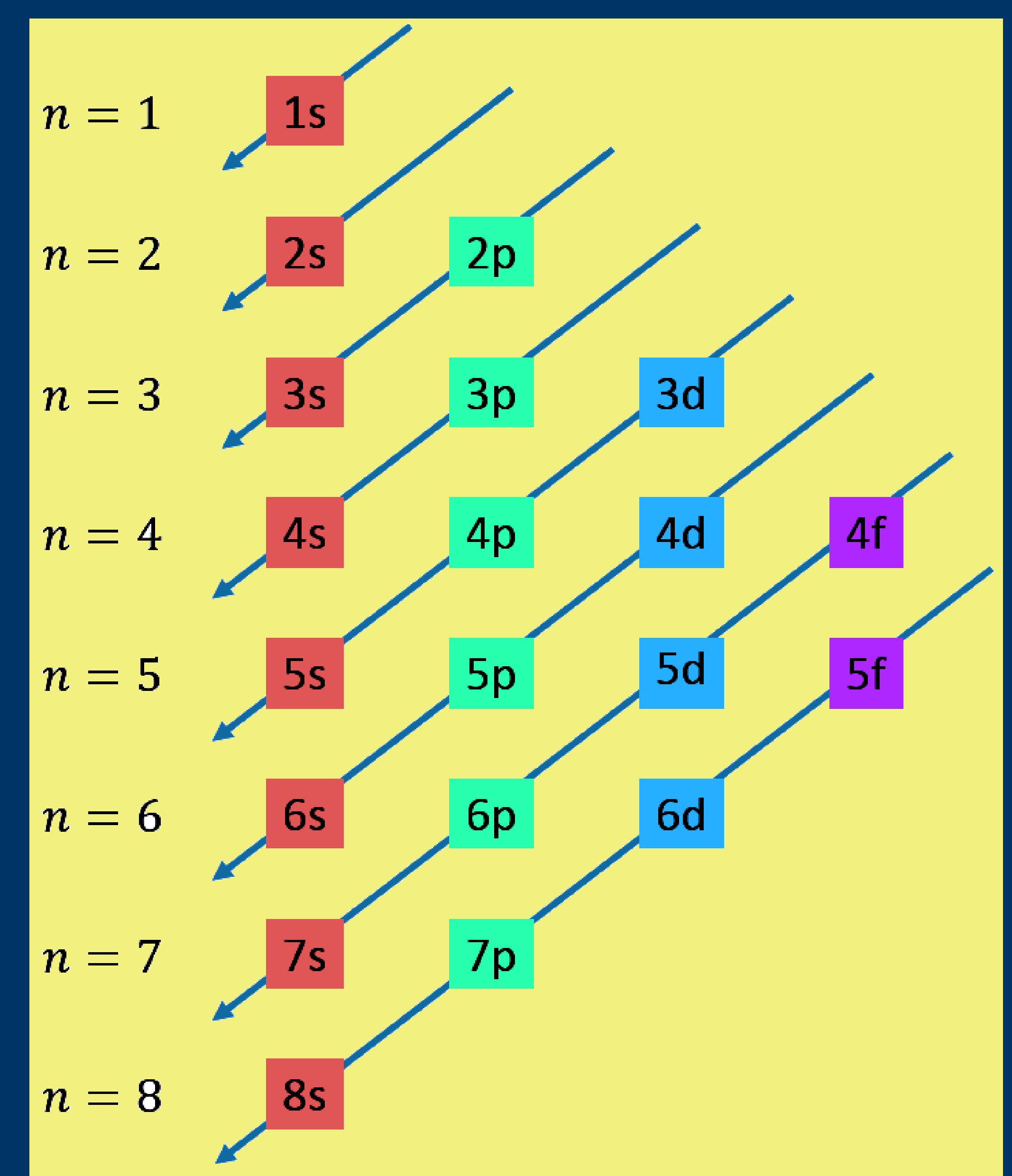
Todos multilobuloados alineadas a varios ejes Z^3, XZ^2, YZ^2, XYZ, $Z(X^2-Y^2)$, $X(X^2-3Y^2)$ y $Y(Y^2-3X^2)$

¿Cómo se ordenan los orbitales?

De acuerdo a su energía

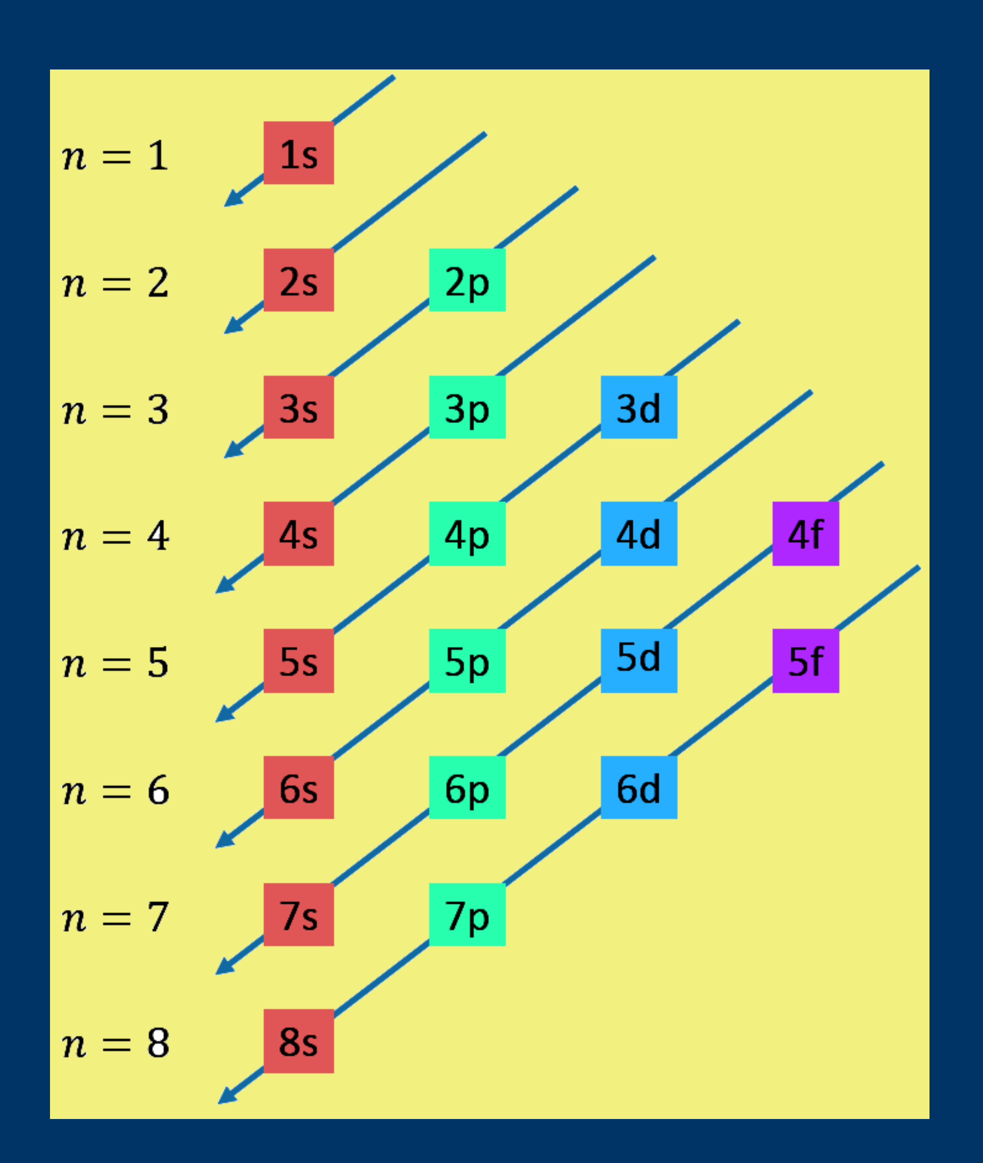
Los electrones llenan los orbitales desde los de menos energía a los más energéticos

El esquema, la Regla de llenado, permite saber el orden de ocupación de los orbitales



¿Qué es la configuración electrónica

Es la serie de orbitales ocupados por los electrones del átomo de un elemento



1° Anotamos de orbital a orbital según la serie de 8 flechas de la Regla de llenado hasta agotar los e- del átomo

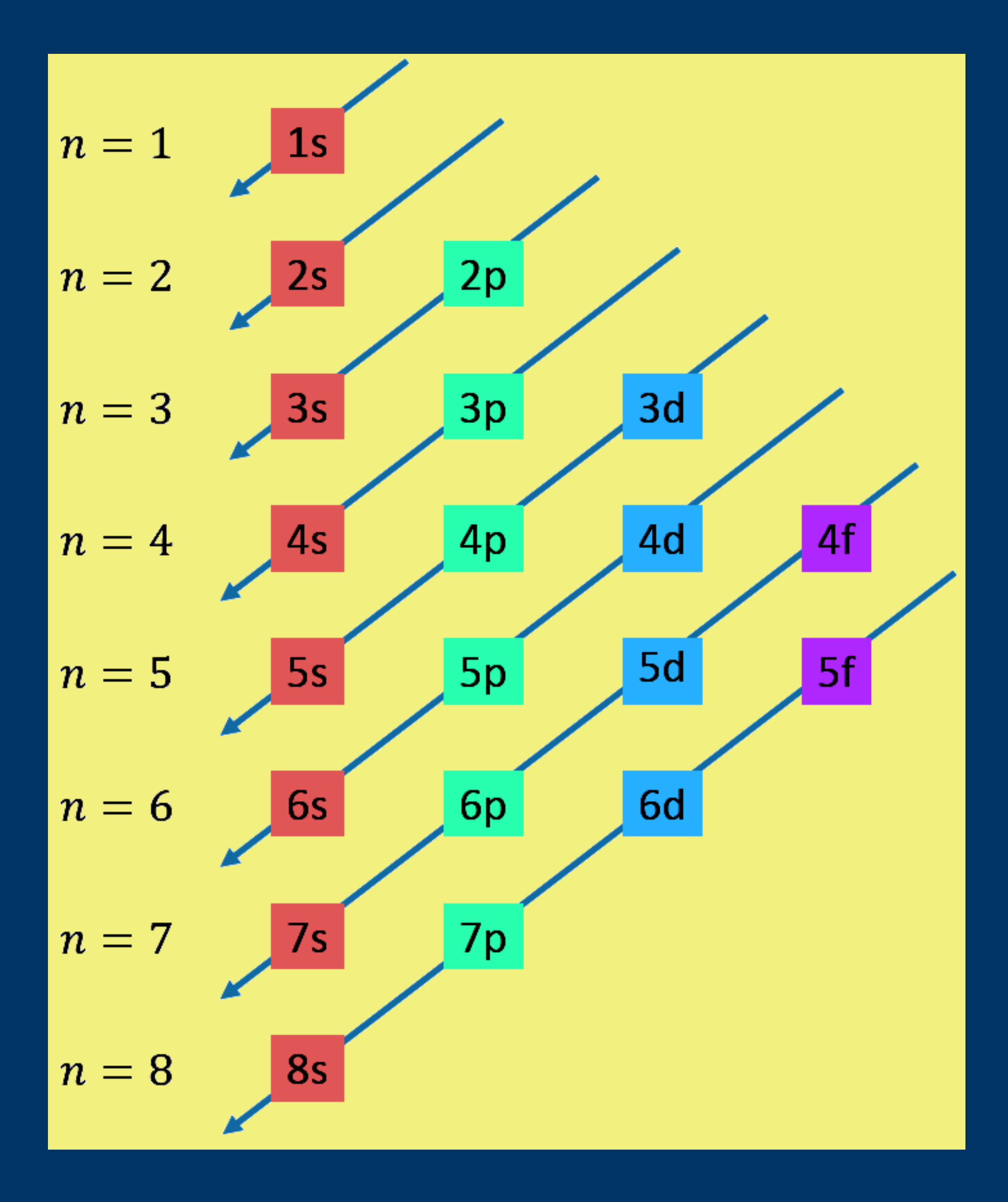
Número atómico Z = # de electrones

$_{1}H = 1s^1$ $_{2}He = 1s^2$ $_{3}Li = 1s^2\ 2s^1$

$_{4}Be = 1s^2\ 2s^2$ $_{5}B = 1s^2\ 2s^2\ 2p^1$

$_{6}C = 1s^2\ 2s^2\ 2p^2$ $_{7}N = 1s^2\ 2s^2\ 2p^3$

¿La Regla de llenado es perfecta?



No, en algunos elementos hay efectos cuánticos que alteran un poco el orden, pero eso es de licenciatura. Continuemos:

$_{8}O = 1s^2\ 2s^2\ 2p^4$

$_{9}F = 1s^2\ 2s^2\ 2p^5$

$_{10}Ne = 1s^2\ 2s^2\ 2p^6$

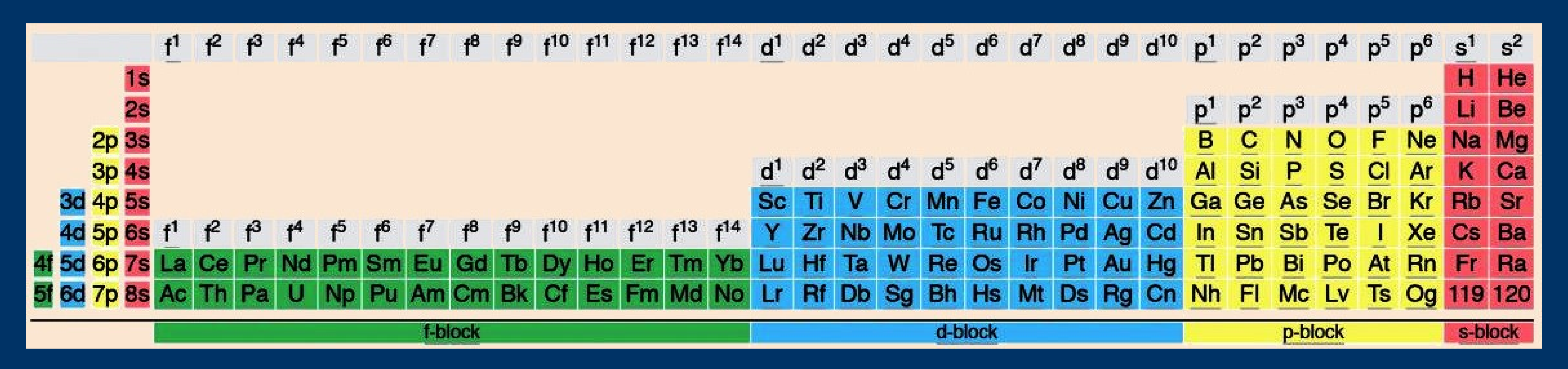
$_{11}Na = 1s^2\ 2s^2\ 2p^6\ 3s^1$

$_{12}Mg = 1s^2\ 2s^2\ 2p^6\ 3s^2$

$_{13}Al = 1s^2\ 2s^2\ 2p^6\ 3s^2\ 2p^1$

¿Podemos resumir la configuración de todos los elementos?

Si, mediante la tabla periódica



En esta versión de la tabla se representa la envoltura electrónica (las capas, subcapas y orbitales que ocupan los electrones) de los átomos de los Elementos

Avanzamos desde la izquierda de cada capa y bajamos a la siguiente al terminar cada renglón